

1.	Nazwa kierunku	technologia chemiczna
2.	Cykl rozpoczęcia	2014/2015 (semestr zimowy)
3.	Poziom kształcenia	studia pierwszego stopnia (inżynierskie)
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Metody obliczeniowe w chemii

Kod modułu: 0310-TCH-S1-036

1. Liczba punktów ECTS: 3

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
0310-TCH-S1-036_1	Zna podstawowe metody mechaniki klasycznej wykorzystywane w mechanice molekularnej do wyznaczania optymalnych geometrii i konformacji cząsteczek	TCh_W09	2
0310-TCH-S1-036_10	Potrafi wyjaśnić strukturę elektronową atomów	TCh_U18	2
0310-TCH-S1-036_11	Umie wyjaśnić budowę prostych cząsteczek chemicznych	TCh_U18	2
0310-TCH-S1-036_12	Umie zastosować odpowiedni funkcjonał DFT do opisu wybranych własności cząsteczek	TCh_U26	5
0310-TCH-S1-036_13	Umie skorzystać z pakietu programów chemii kwantowej	TCh_U24	3
0310-TCH-S1-036_2	Zna i rozumie podstawowe pojęcia mechaniki kwantowej	TCh_W06	3
0310-TCH-S1-036_3	Rozumie zasady budowy atomów i wyjaśnia ich właściwości	TCh_W08	4
0310-TCH-S1-036_4	Rozumie naturę wiązania chemicznego i potrafi scharakteryzować różne jego typy	TCh_W06	4
0310-TCH-S1-036_5	Rozumie budowę prostych cząsteczek	TCh_W07	4
0310-TCH-S1-036_6	Rozumie podstawy metody funkcjonałów gęstości (DFT) i potrafi ocenić przydatność różnych funkcjonałów do konkretnych obliczeń	TCh_W09 TCh_W24	2 2

0310-TCH-S1-036_7	Zna i rozumie podstawy metod obliczeniowych chemii kwantowej	TCh_W23 TCh_W24	2 2
0310-TCH-S1-036_8	Potrafi zastosować wybrany program z pakietu programów obliczeniowych do wyznaczania optymalnej geometrii małych cząsteczek	TCh_U19 TCh_U24	2 2
0310-TCH-S1-036_9	Potrafi wybrać i zastosować właściwy program mechaniki molekularnej do wyznaczania optymalnej geometrii cząsteczki	TCh_U17	3

3. Opis modułu	
Opis	Moduł Metody obliczeniowe w chemii ma za zadanie zapoznanie studentów z podstawowymi pojęciami i metodami chemii obliczeniowej. Student zostanie zapoznany z ważniejszymi możliwościami wykorzystania metod mechaniki molekularnej i chemii kwantowej do opisu struktury i własności cząsteczek chemicznych a także do opisu zjawisk spektroskopowych.
Wymagania wstępne	Znajomość pojęć matematyki wyższej (pochodnej, całki, prostych równań różniczkowych). Znajomość rachunku wektorowo-macierzowego. Umiejętność posługiwania się komputerem.

4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
0310-TCH-S1-036_w_1	egzamin	Egzamin pisemny weryfikujący wiedzę w oparciu o treści wykładów i ćwiczeń oraz wskazaną w sylabusie literaturę	0310-TCH-S1-036_1, 0310-TCH-S1-036_2, 0310-TCH-S1-036_3, 0310-TCH-S1-036_4, 0310-TCH-S1-036_5, 0310-TCH-S1-036_6, 0310-TCH-S1-036_7
0310-TCH-S1-036_w_2	kolokwium pisemne	Ocena wiedzy zdobytej na wykładach i ćwiczeniach laboratoryjnych oraz w czasie samodzielnej pracy z podręcznikiem	0310-TCH-S1-036_1, 0310-TCH-S1-036_10, 0310-TCH-S1-036_11, 0310-TCH-S1-036_2, 0310-TCH-S1-036_3, 0310-TCH-S1-036_4, 0310-TCH-S1-036_5, 0310-TCH-S1-036_6, 0310-TCH-S1-036_7
0310-TCH-S1-036_w_3	ocenie ciągłe	Ocena umiejętności posługiwania się pakietami obliczeniowymi. Wskazywanie obszarów studentowi, na które powinien zwrócić szczególną uwagę	0310-TCH-S1-036_12, 0310-TCH-S1-036_13, 0310-TCH-S1-036_8, 0310-TCH-S1-036_9
0310-TCH-S1-036_w_4	sprawozdanie	Ocena poprawności wykonania ćwiczeń i interpretacji wyników	0310-TCH-S1-036_12, 0310-TCH-S1-036_13, 0310-TCH-S1-036_8, 0310-TCH-S1-036_9

5. Rodzaje prowadzonych zajęć						
kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów kształcenia
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
0310-TCH-S1-036_fs_1	wykład	Wykład omawiający podstawowe zagadnienia chemii obliczeniowej	15	Praca ze wskazaną literaturą przedmiotu obejmująca samodzielne przyswojenie wiedzy odnośnie wskazanych zagadnień na wykładzie.	15	0310-TCH-S1-036_w_1
0310-TCH-S1-036_fs_2	laboratorium	Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące obliczenia kwantowochemiczne	30	Przygotowanie do ćwiczeń laboratoryjnych oraz sprawdzianów przez samodzielną pracę z literaturą. Przygotowanie sprawozdań z wykonanych ćwiczeń.	40	0310-TCH-S1-036_w_2, 0310-TCH-S1-036_w_3, 0310-TCH-S1-036_w_4